

NEDOエネルギー・地球環境分野成果報告会2026 プログラムNo. 603-2-12

自動自律ロボットシステムを活用した 次世代プロトン伝導材料の研究開発

契約件名 水素利用拡大に向けた共通基盤強化のための
研究開発事業/次世代燃料電池・水電解の要素技術開発

発表：2026年7月22日

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構

発表者名 長田裕也

(国研) 物質・材料研究機構

問い合わせ先 E-mail: NAGATA.Yuuya@nims.go.jp

事業概要

1. 期間

開始 : 2025年6月

終了(予定) : 2030年3月

2. 最終目標

本事業では、高温作動型プロトン伝導燃料電池の実現に向けて、剛直高分子を基盤とする新規プロトン伝導材料を創出するとともに、その成膜、膜厚計測、交流インピーダンス測定、データ解析を自動自律化した評価基盤を構築する。最終的には、120℃、30%RH、膜厚5 μm の条件において高いプロトン伝導率を示す材料候補を見いだし、ロボット実験とベイズ最適化を組み合わせた高スループット材料探索システムを確立する。

3. 成果・進捗概要

初年度は、プロトン伝導膜評価専用のプリント基板を設計・試作し、多チャンネル対応インピーダンス測定システムと組み合わせた自動評価系を構築した。Chemspeed SWING上でドロップキャスト法による成膜を行い、既知プロトン伝導材料を用いて面内方向の交流インピーダンス測定を自動で実行できることを確認した。また、デジタルマイクロスコープによる膜厚自動計測と組み合わせることで、伝導率算出までを自動化するための基本経路を確立した。さらに、モノマー、ポリマー単分子、バルクポリマーを対象とする多階層理論計算を開始し、酸性度、分解耐性、自由体積、水分子配置などの材料設計指標を抽出する体制を整備した。理化学研究所との連携により、自動合成ロボットを外部入力ファイルで制御する技術開発も進展しており、今後のDBTLループ構築と組成自律最適化に向けた基盤が整いつつある。

1. 事業の位置付け・必要性

- 水素社会の実現に向けて、燃料電池および水電解システムの高性能化、高耐久化、低コスト化は重要な技術課題である。特に、高温かつ低加湿条件で作動可能なプロトン伝導膜は、燃料電池システムの効率向上、熱管理の容易化、白金触媒使用量の低減に資する基盤材料として期待される。しかし、従来のプロトン伝導材料では、高温低湿条件における十分な伝導性、機械的安定性、化学的耐久性を同時に満たすことが容易ではなく、新規材料系の探索と評価手法の高度化が必要である。
- 本事業は、高温作動型プロトン伝導燃料電池の実現に向けた共通基盤技術として、剛直高分子を基盤とする新規プロトン伝導材料の探索と、その評価を自動自律化するロボットシステムの構築を目的とする。材料合成、成膜、膜厚計測、交流インピーダンス測定、データ解析を一連の自動実験プロセスとして統合することにより、従来は手作業に依存していたプロトン伝導膜評価の再現性とスループットを向上させる。
- 本事業の意義は、単に個別材料を開発することにとどまらず、材料設計、ロボット実験、理論計算、データ駆動型最適化を接続したDBTL型の研究基盤を構築する点にある。これにより、多成分かつ多条件の広い探索空間を効率的に評価し、高温低湿条件で優れた性能を示すプロトン伝導材料候補を迅速に抽出できるようになる。したがって、本事業は次世代燃料電池の社会実装に必要な材料開発を加速する共通基盤技術として位置付けられる。

2. 研究開発マネジメントについて

- 研究開発の目標と目標設定の考え方(根拠)
 - 本研究開発は、高温低湿条件下で動作する次世代燃料電池に向け、剛直高分子プロトン伝導材料と自動自律評価基盤を創出することを目標とする。燃料電池技術開発ロードマップに基づき、120℃、30%RHで高伝導性と耐久性を両立する材料探索が不可欠であることを根拠とした。
- 研究開発のスケジュール
 - 初年度は、専用基板、多チャンネルインピーダンス測定系、膜厚自動計測系を整備し、既知材料で自動測定を実証する。2026年度以降は、多成分系膜へ対象を拡張し、自動合成、評価、理論計算、ベイズ最適化を接続したDBTLループへ展開する。
- 研究開発の実施体制
 - NIMSは、剛直高分子材料の設計・合成、成膜、膜厚計測、インピーダンス測定を含む自動評価系の構築を担当する。理化学研究所は、自動合成ロボットの外部制御化と最適化アルゴリズムの実装を担い、両者の協力を通じて自律探索基盤を構築する。
- その他、研究開発の進捗管理(マネジメント)や知的財産戦略に関する独自の取り組み等
 - 進捗管理では、中間目標に対応する成膜、自動測定、拠点化の達成状況を定期的に確認し、測定データとシステムログを蓄積する。知的財産については、新規材料、成膜・評価プロセス、自動測定系、最適化手法を整理し、出願可能性を継続的に検討する。

3. 研究開発成果について

- 研究開発の目標及び進捗状況、目標達成に向けたアプローチ
 - 高温低湿条件で作動する次世代燃料電池に向け、剛直高分子を基盤とする新規プロトン伝導材料を探索し、成膜、膜厚計測、交流インピーダンス測定、データ解析を自動自律化することを目標とする。初年度は専用基板と多チャンネル測定系を構築し、既知材料で自動測定を実証した。
- 研究開発の成果と意義
 - Chemspeed SWING上での成膜、専用基板への接続、膜厚自動計測、インピーダンス測定を組み合わせ、プロトン伝導率評価の自動化基盤を構築した。また、多階層理論計算により、酸性度、分解耐性、自由体積、水分子配置などの設計指標を抽出する体制を整えた。
- 特許や論文、学会発表、広報等の取り組み
 - 新規プロトン伝導材料、成膜・評価プロセス、自動測定システム、最適化アルゴリズムに関する成果を整理し、特許出願の可能性を検討する。論文発表に向けて基礎データを蓄積し、NEDO内会合、関連学会、NIMS広報媒体等を通じた成果発信を進める。

次ページから詳細についてから紹介する

3. 研究開発成果について

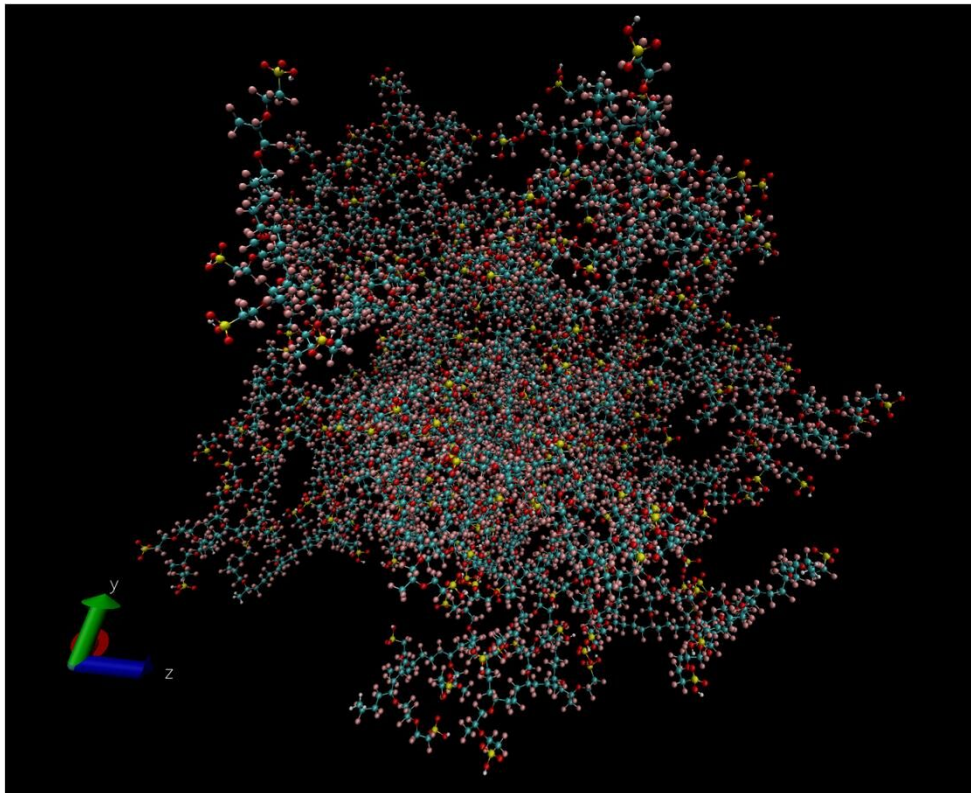


- 自動合成ロボット(Chemspeed SWING)をセットアップし、材料合成及び自動成膜について現在検討を進めている。
- 並行して、理論化学計算(DFT計算)で有望な分子構造を探索し、合成を進めている。

3. 研究開発成果について



秋山 世治
(理研TRIP-AGIS,
ポリマーオミクスチーム)



既知のプロトン伝導材料について
計算した構造の例（ナフィオン）

RadonPy: 全原子分子動力学(MD)シミュレーションにより、ポリマーの物性を計算するためのPythonライブラリ。高分子の繰り返し単位とその化学構造、重合度、温度等の計算条件を入力とし平衡・非平衡MDシミュレーション、平衡化完了の自動判定、収束失敗時の再スタートのスケジューリング、ポストプロセス段階での物性計算等、MDシミュレーションの全工程を自動で行う。

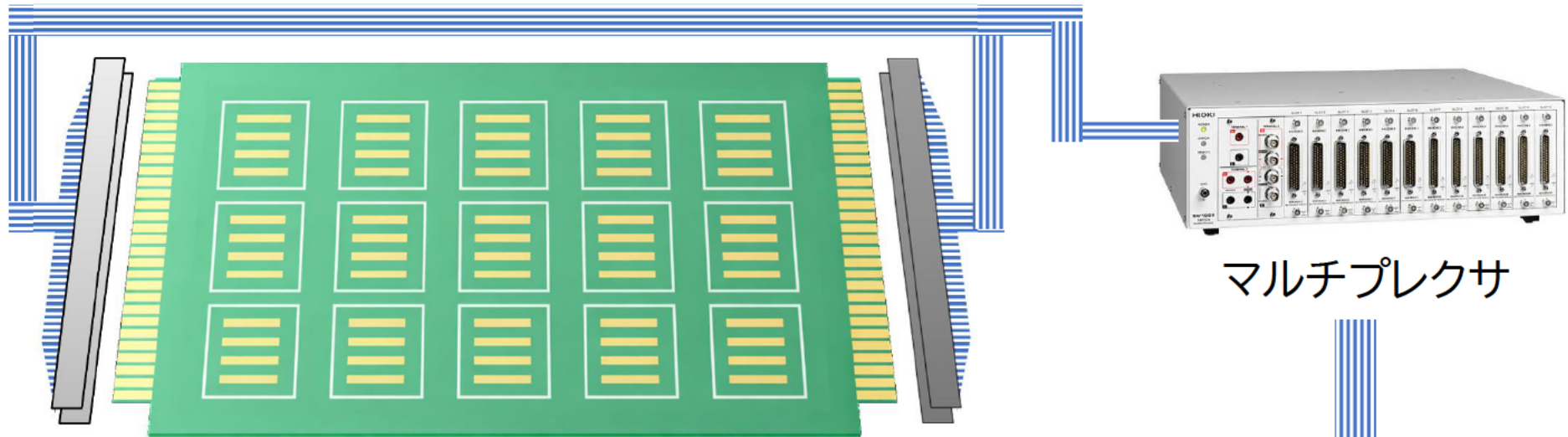
現在RadonPyを用いて、全自動で以下のようなパラメータを推定できる。

回転半径, 自己拡散係数, 定圧比熱, 定積比熱, 等温圧縮率, 等エントロピー圧縮率, 体積弾性率, 等エントロピー体積弾性率, 体積熱膨張係数, 線膨張係数, 平均二乗変位, 静的誘電率, ネマティック秩序パラメータ

これらを記述子として用いることで、プロトン伝導性の予測について検討している。

3. 研究開発成果について

プロトン伝導膜評価専用のプリント基板を独自に設計／作製



マルチプレクサ

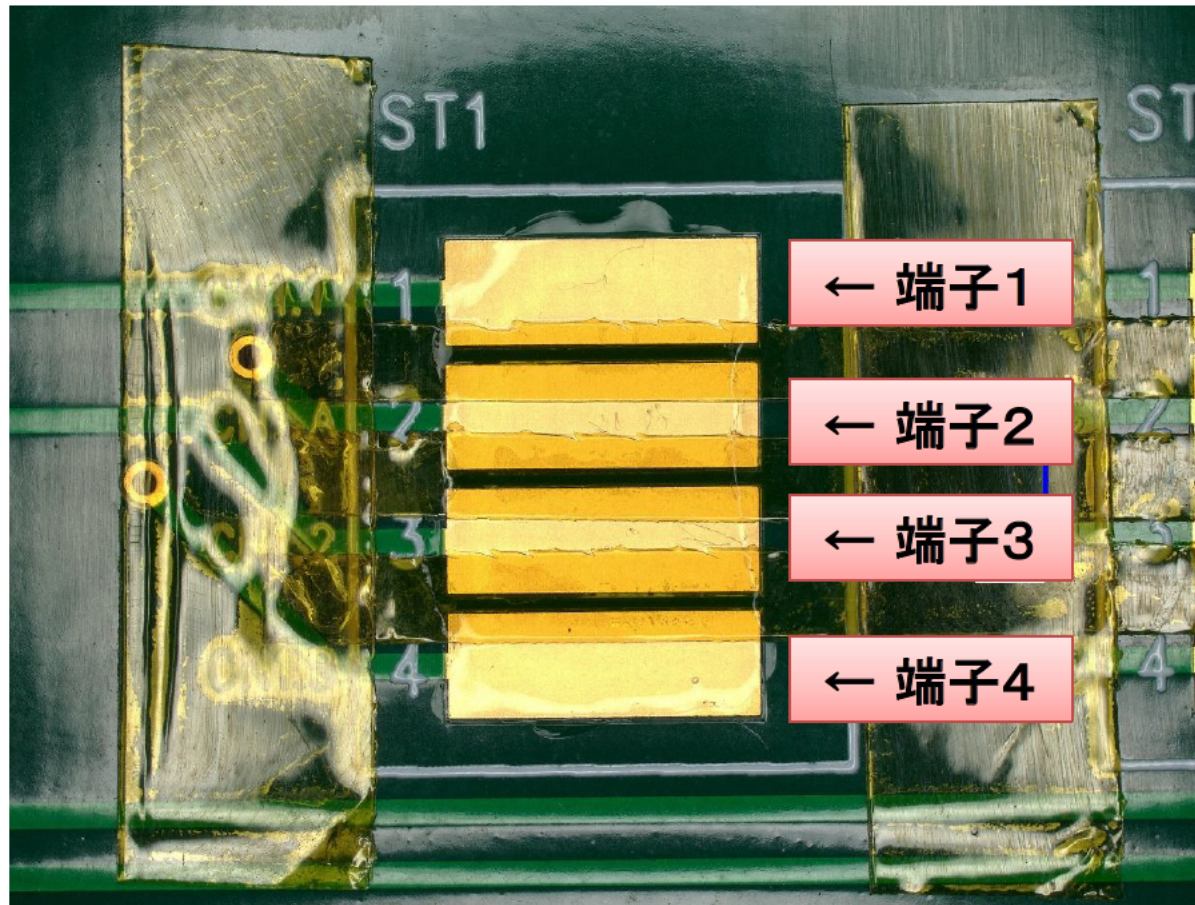


インピーダンス
アナライザ

- ポリマー溶液の塗布サイトを18箇所設定した。
- それぞれに4個の金メッキ端子を作製 ($18 \times 4 = 72$ 端子)
- 左右にカードエッジコネクタ（裏表で36端子 x 左右2箇所 = 72 端子接続可能）
- インピーダンスの測定値からプロトン伝導度を推定する

3. 研究開発成果について

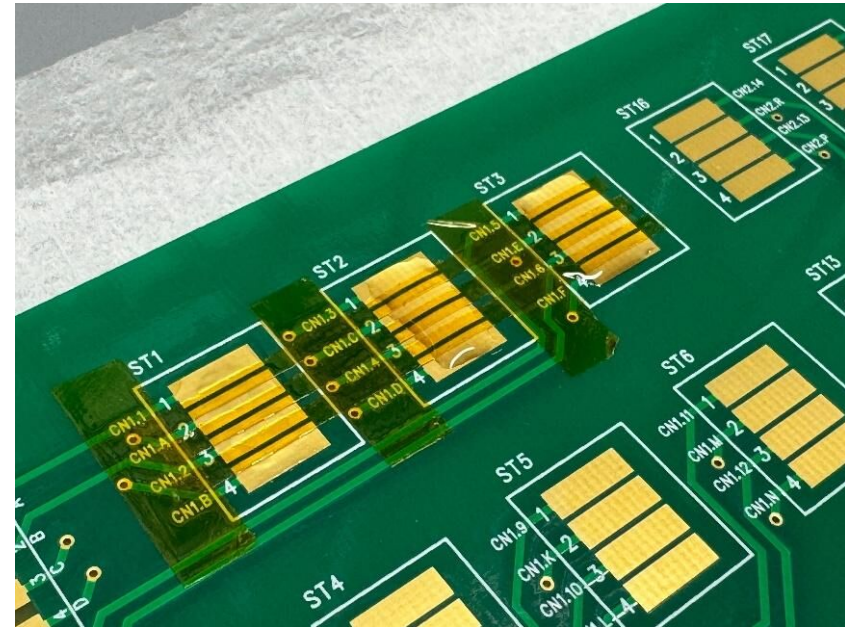
自動測定用基板に関する検討



- 2mm 幅のカプトンテープを端子間に貼り付けることで端子間距離を調整した。端子1と端子4の間の距離が 8 mm になるよう調整した。
- デジタルマイクロスコープによる観察でプロトン伝導材料の膜厚を推定した。

3. 研究開発成果について

自動測定用基板に関する検討



- ナフイオン分散液を塗布し、加熱して乾燥させることで**基板上に薄膜を形成**させることに成功した。
- ナフイオン膜の厚さはおよそ $100\text{ }\mu\text{m}$ 、端子間距離は 8 mm 、電極幅は 7.5mm となっている。無加湿常温状態にて、 10kHz , 10mV でのインピーダンス測定を行ったところ $22.1\text{k}\Omega$ となり、このときのプロトン伝導度を推定すると 約 4.8 mS cm^{-1} となった。
- これは無加湿常温という点を考慮すれば妥当な数値だと考えられ、**自動測定用基板**による測定が可能であることが確認できた。

4. 今後の見通しについて

- 実用化・事業化のイメージ
 - 本成果は、**高温低湿条件で作動する次世代燃料電池用プロトン伝導膜の材料探索基盤**として活用される。自動成膜、膜厚計測、インピーダンス測定、データ解析を統合することで、候補材料の評価を高速化し、燃料電池システムの高性能化、高耐久化、低コスト化に資する材料開発へ展開する。
- 実用化・事業化に対する今後の課題と対応方針
 - 実用化に向けては、120°C、30%RHにおける高いプロトン伝導率、5 μm程度の薄膜化、機械的強度、化学的耐久性、量産適性を同時に満たす必要がある。これらの課題に対し、**剛直高分子の分子設計、多階層理論計算、自動評価データの蓄積を組み合わせ、材料候補と成膜条件を段階的に絞り込む**。
- 実用化・事業化に向けた具体的な取り組み
 - 今後は、**多種多成分系プロトン伝導膜へ評価対象を拡張し、NIMSの自動評価系と理化学研究所の自動合成ロボットを接続する**。さらに、ベイズ最適化等を用いたDBTL型探索を試運用し、1日12サンプル以上の自動測定および組成自律最適化の実証を目指す。
- その他、顕著な経済・技術・社会的な効果、人材育成の取り組み等
 - 本研究は、燃料電池材料に加え、水電解膜や耐熱性イオン伝導材料の探索にも波及し得る。自動自律実験基盤の構築により、**経験依存型の材料開発をデータ駆動型研究へ転換**できる。また、**ロボット実験、理論計算、材料化学を横断的に扱える人材育成**にも寄与する。